

Graphen und biologische Netze Praktikum

Christina Kuhn
Robin Goldmann
Johann Wurz

Was haben wir gemacht?

Substrate loader

Alignment workflow

Vergleich von Guide trees

GraphDating bugfixes

Probleme

Substrate loader

ECtoJSONloader.py

Eingaben:

EC-subtree

Anzahl gewollter Substrate

Maximale Anzahl von Knoten pro Substrat (ohne Wasserstoffatome)

Alignment workflow

Schwierige Implementation auf Grund von crappy Programmen

Automatisierung von Parsing bis Visualisierung mit Neo4J

Namen, Wasserstoff, Alginment, Visualisierung

Vergleich von Guide trees

GraphDating bugfixes

Kompatibilität von Graphformaten

Labelfunktionen angepasst

Output angepasst

Probleme

Mehrere Substrate für Enzyme

Graphformate nicht kompatibel

Nicht mehr als drei Graphen alignbar

Stark von Größe abhängig (wie erwartet)

Hinterfragt das Ziel des Praktikums

Scoring Matrix für multiVitamin erstellt